

Examen de química quàntica 14-09-1996

Feu 6 de les 7 preguntes.

1. Demostreu que els valors propis d'un operador hermític són reals.
2. Apliqueu les regles de quantificació de Sommerfeld-Wilson a un rotor rigid de moment d'inèrcia I . Deduiu l'equació per a les energies permeses d'aquest rotor.
3.
 - Un electró està confinat a una caixa monodimensional de 20 Å. Calculeu el nombre de nivells entre 1 i 5 eV i la freqüència $\nu(cm^{-1})$ de la radiació que s'emetria en fer-se una transició entre els estats més alt i més baix de l'interval 1 a 5 eV esmentat. (Dades: carrega de l'electó $1.6022 \cdot 10^{-19}C$, massa de l'electó $9.11 \cdot 10^{-31}Kgr$, $h = 6.6 \cdot 10^{-34}J \cdot sec$).
 - Calculeu el nombre quàntic d'una bola de 10 gr. que es mou a una velocitat de 10 m/s, confinada en una caixa monodimensional de longitud 1 m.
4. Calculeu l'energia cinètica mitjana d'un oscil·lador armònic en un estat amb nombre quantic v . (Dades: $b = \frac{1}{\sqrt{2}}(\xi + \frac{d}{d\xi})$, $b^+ = \frac{1}{\sqrt{2}}(\xi - \frac{d}{d\xi})$, $\mathcal{H} = \hbar\omega(b^+b + \frac{1}{2})$, $\xi = x\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$, $T = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2}$).
5. Amb l'ajut del mètode Hückel determineu quina és la geometria més estable del H_3^+ (triangular o lineal). També del H_3 i del H_3^- .
6.
 - Amb 3 electrons podem obtenir dos acoblaments (doblet) d'espín $\frac{1}{2}$, descrits per les funcions $\phi_1 = 2\alpha\alpha\beta - \alpha\beta\alpha - \beta\alpha\alpha$ i $\phi_2 = \alpha\beta\alpha - \beta\alpha\alpha$. Normalitzeu aquestes funcions.
 - L'orbital molecular $\phi = \frac{1}{2}\psi_1 + \frac{3}{4}\psi_2$ esta normalitzar com també ho estan els orbitals atòmics ψ_1 i ψ_2 . Calculeu el solapament $\langle\psi_1|\psi_2\rangle$.
7. Demostreu que la funció $d_{xy} = xy$ és pròpia de \widehat{L}^2 pero no ho és de \widehat{L}_z .